

# 洞态氙离子的退激发及末电离态离子 分布的理论研究<sup>\*</sup>

胡宏伟 董晨钟<sup>†</sup>

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)  
(2006 年 4 月 3 日收到, 2006 年 6 月 26 日收到修改稿)

在描述洞原子(或离子)退激发过程只考虑单俄歇跃迁和辐射跃迁的辐射-单俄歇级联退激发模型的基础上, 进一步考虑了双俄歇跃迁的贡献, 发展了辐射-单俄歇-双俄歇级联退激发模型. 据此模型研究了  $\text{Ar}^+(1s^{-1})1s$  洞态氙离子)和  $\text{Ar}^+(2s^{-1})2s$  洞态氙离子)的退激发过程及末电离态离子的分布, 获得了与实验相符的结果.

关键词: 辐射-单俄歇级联退激发模型, 双俄歇跃迁, 辐射-单俄歇-双俄歇级联退激发模型, 洞离子退激发

PACC: 3280H, 3280D, 3270F

## 1. 引 言

洞原子(或离子)是指内壳层失去电子而形成的处于激发态的原子(或离子). 它可以由原子核俘获内壳层电子或者由内壳层电子的光电离而产生, 也可通过电子或离子的碰撞使原子(或离子)的内壳层电子激发或电离而产生. 此外, 近来的实验发现, 高离化离子以适当速度与金属表面碰撞时通过多电子俘获也能形成洞原子<sup>[1]</sup>. 由于洞原子一般都处在高激发态, 它必定要向低能级退激发. 退激发机制有多种, 可以归为两类. 一类是辐射跃迁, 包括单光子跃迁(如: 电偶极跃迁、电四极跃迁、磁偶极跃迁、磁四极跃迁)和双光子跃迁等; 另一类是非辐射跃迁, 包括单俄歇跃迁、双俄歇跃迁、振激过程及振离过程等. 如果洞态由初态经一步退激发后的态还是激发的, 则它还要进一步退激发, 直到稳态, 即所谓的级联退激发过程. 因此, 洞激发态的退激发过程是非常复杂的. 洞原子(或离子)广泛存在于实验室和天体等离子体中, 对它的研究不仅能详细地提供原子(或离子)的内壳层电子结构及其退激发过程的动力学规律, 而且能为解释实验结果和各种等离子体过

程中的离子态布居提供依据. 因此, 对洞原子(或离子)退激发过程的研究具有重要的理论和实践意义.

数十年来, 对洞原子(或离子)退激发的理论研究和实验研究工作已取得了很大进展. 在实验方面, 如 Viehhaus 等<sup>[2]</sup>用角向定位的电子-电子符合技术研究了氙离子的  $2p$  洞态退激发过程中的  $L_{2,3}-MMM$  双俄歇跃迁; Tawara 等<sup>[3]</sup>用同步辐射技术对氙离子的  $M$  洞态退激发过程进行了研究. Carlson 等<sup>[4]</sup>根据特征 X 射线测量了氙离子的  $M$  壳层洞态和  $L$  壳层洞态形成的末电离态离子的分布; 后来, Carlson 等<sup>[5]</sup>用同样的方法测量了氙离子的  $K, L$  壳层洞态退激发产生的末电离态离子的分布和氙离子的  $K, L, M, N$  壳层洞态退激发产生的末电离态离子的分布等<sup>[5]</sup>; Church 等<sup>[6]</sup>用同步辐射技术对氙离子的  $K$  壳层和  $L$  壳层洞态退激发过程进行了研究. 近几年, 随着双激光等离子体吸收光谱技术、离子储存环技术、电子束离子阱技术和阿秒激光脉冲抽运探测技术的发展, 使得人们对原子和离子的内壳层激发态的结构及其退激发过程的研究更为广泛、深入<sup>[7-9]</sup>, 已能在时域上直接观测洞原子态的寿命<sup>[10]</sup>. 在理论方面, 人们不但对复杂原子或离子的内壳层激发态的电子结构和具体跃迁过程(辐射和非辐射

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10376026, 10434100)、兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金和科学技术部国际合作计划(批准号: CI-2004-07)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: dongcz@mwnu.edu.cn

过程)的概率、光谱及电子能谱等进行了大量的研究<sup>[11-14]</sup>,而且建立了洞态的多种退激发模型,并据此研究了氙、氙和氙等原子(或离子)的不同壳层洞态的末电离态离子的分布.如 Omar 和 Hahn<sup>[15]</sup>用辐射-单俄歇级联退激发(RAC)模型研究了洞态氙离子的退激发过程,并计算了其退激发后的末电离态离子的分布,但他们的理论结果与 Carlson 和 Hunt 的实验符合得不够好.随后,他们进一步考虑了振离过程的贡献,在辐射-单俄歇级联退激发模型的基础上构建了辐射-单俄歇-振离级联退激发(RACS)模型,并对洞态氙离子的退激发过程和末电离态离子的分布情况进行了进一步研究,虽然他们的理论计算结果与实验观测结果符合得较好,但是计算的低价稳定的末电离态离子的相对丰度比实验值还是略高,而高价稳定的末电离态离子的相对丰度比实验值略低<sup>[16]</sup>. Kochur 与 Dudenko 等<sup>[17]</sup>进一步利用 RACS 模型对氙离子的  $L_{2,3}$ ,  $M_1$ ,  $M_{2,3}$ ,  $N_1$ ,  $N_{2,3}$  和  $N_{4,5}$  洞态的退激发过程进行了研究,计算结果与实验相比依然是低价稳定的末电离态离子的相对丰度比实验值略高、高价稳定的末电离态离子的相对丰度比实验值略低.

为了解释已有的 RAC 和 RACS 理论模型与实验结果的不一致问题,我们进一步考虑了双俄歇跃迁(double Auger transition)在退激发过程中的贡献,在 RAC 模型的基础上发展了 RACDA 模型,并用此模型研究了  $\text{Ar}^+(1s^{-1})1s$  洞态氙离子)和  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  ( $2s$  洞态氙离子)退激发过程及末电离态离子的分布.

## 2. 洞原子(或离子)的退激发过程及 RACDA 模型

一般而言,洞原子(或离子)退激发到稳定状态的路径是极其复杂的,且复杂程度随洞深度的增加而急剧增加.这是因为初洞态第一步退激发衍生的众多一级分支中,有许多依然处于激发状态,它们还要退激发,又衍生许多二级分支,这样依次退激发下去,直到稳态.这些众多的退激发路径构成树状结构,被形象地称为“退激发树”.一个洞态(初洞态或分支洞态)一步退激发一般要跃迁至许多不同的态,跃迁到这些态的概率是各不相同的.跃迁到某态的概率与跃迁到所有态的概率之和的比值可以用来衡量跃迁到这个态的相对强度,这个比值被称

为“分支比”.由于每一步退激发一般都有许多同级分支,因此初洞态退激发到某一稳定末电离态的路径有许多条,退激发路径也被称为“退激发通道”.一般而言,洞原子(或离子)的退激发过程是由许多不同的退激发通道组成的.洞较深时,退激发通道数目惊人,如氙的  $L$  壳层洞态的退激发通道就有十多万条<sup>[17]</sup>.

基于对不同的退激发机制的考虑,人们已经建立了不同的退激发模型.如考虑单俄歇跃迁和辐射跃迁两种退激发机制而建立的 RAC 模型,考虑单俄歇跃迁、辐射跃迁和振离过程而建立的 RACS 模型<sup>[16]</sup>.然而,就像前面已经指出的,虽然这些已有的退激发模型能给出洞原子(或离子)退激发后的各价末电离态离子分布的大致趋势,但还不能很好地解释高价末电离态离子的相对丰度较高、低价末电离态离子的相对丰度较低的结果.根据人们对双俄歇跃迁特性的研究结果<sup>[18-22]</sup>,我们在 RAC 模型的基础上进一步考虑了双俄歇跃迁对退激发的贡献,构建了 RACDA 模型.

以上提到的双俄歇跃迁是指深壳层洞向外漂移时,外层的两个电子同时被激发而散射出去的退激发过程. Amusia 等<sup>[23]</sup>通过理论研究认为双俄歇跃迁发射出的两个俄歇电子的能量是不同的,一个电子的能量特别大,另一个特别小.近来, Viefhaus 等<sup>[21]</sup>对氙离子的  $2p$  洞态退激发过程中的  $L_{2,3}$ - $MMM$  双俄歇跃迁的实验进一步证实了上述论述.据此推测,两个电子同时来自内壳层轨道的双俄歇跃迁概率应该很小.另一方面,文献[18, 20, 24]中对双俄歇跃迁概率的理论计算表明:两个电子同时来自内壳层轨道的双俄歇跃迁概率确实很小,而来自外壳层轨道的双俄歇跃迁概率较大;同时,一个来自最外层、一个来自内层,或者两个都来自最外层的双俄歇跃迁概率非常大.因此,在 RACDA 模型中,我们只考虑了双俄歇跃迁中的两个俄歇电子中至少有一个来自最外层的情况.

## 3. RACDA 模型下末电离态离子分布的计算

洞原子(或离子)在退激发后形成的各价稳定的末电离态离子的相对丰度取决于初洞态退激发到该电离态的通道多少以及各通道上每一步退激发的分支比的大小.为了描述电离度为  $Z_i$  的初洞态经所有可能的退激发通道退激发后形成的离化度为  $Z_i$  的

末电离态离子的相对丰度,我们采用文献<sup>[15,16]</sup>的方法,定义了一个末电离态离子的相对丰度——分支比函数

$$u(Z_i \rightarrow Z_f) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\omega). \quad (1)$$

(1)式等号左端是末电离态的相对丰度, $\alpha$ 指具体某一条通道,求和是对所有通道进行的, $F_{\alpha}(\omega)$ 是由 $\alpha$ 通道产生的末电离态离子的相对丰度,可以用下式计算:

$$F_{\alpha}(\omega) = \prod_{i=1}^{Z_f - Z_i} (\omega_{SA}^{p_i} \omega_{DA}^{q_i} \omega_R^{r_i}). \quad (2)$$

这里, $\omega_{SA}^{p_i}$ 、 $\omega_{DA}^{q_i}$ 和 $\omega_R^{r_i}$ 分别表示在 $\alpha$ 通道中的某步退激发单俄歇、双俄歇和辐射跃迁的分支比;而 $p_i$ 、 $q_i$ 和 $r_i$ 由 $\alpha$ 通道确定,它们都是取值为0,1,2,3,....的整数.

例如,洞组态 $Ar^+(1s^{-1})$ 通过其中的一条通道 $1s^1 2s^2 2p^6 3s^2 sp^6(1) \rightarrow 1s^2 2s^0 2p^6 3s^2 3p^6(2) \rightarrow 1s^2 2s^1 2p^5 3s^6 3p^6(3) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s^1 3p^3(4) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^1(5) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^0(6)$ 退激发到6价稳定的末电离态的相对丰度可写为

$$F_{\alpha}(\omega) = \omega_{SA}(1 \rightarrow 2) \omega_{SA}(2 \rightarrow 3) \omega_{DA}(3 \rightarrow 4) \times \omega_{SA}(4 \rightarrow 5) \omega_R(5 \rightarrow 6). \quad (3)$$

这里 $\omega_{SA}(1 \rightarrow 2)$ 、 $\omega_{SA}(2 \rightarrow 3)$ 、 $\omega_{DA}(3 \rightarrow 4)$ 、 $\omega_{SA}(4 \rightarrow 5)$ 和 $\omega_R(5 \rightarrow 6)$ 分别为由组态1经单俄歇跃迁至组态2的分支比、由组态2经单俄歇跃迁至组态3的分支比、由组态3经双俄歇跃迁至组态4的分支比、由组态4经单俄歇跃迁至组态5的分支比和由组态5经辐射跃迁至组态6的分支比.洞组态 $C$ 跃迁到组态 $C'$ 的分支比由下式计算:

$$\omega(C \rightarrow C') = \frac{P^0(C \rightarrow C')}{\sum_i P_i^{SA}(C \rightarrow C_i) + \sum_j P_j^{DA}(C \rightarrow C_j) + \sum_k P^R(C \rightarrow C_k)}. \quad (4)$$

(4)式等号右端的分子是组态 $C$ 到组态 $C'$ 跃迁概率,可以是单俄歇跃迁概率,也可以是双俄歇跃迁或者辐射跃迁概率.(4)式等号右端分母中的三项为该步退激发中所有单俄歇跃迁概率、双俄歇跃迁概率和辐射跃迁概率的总和.

这里,从组态 $C$ 跃迁到组态 $C'$ 的概率 $P$ 可以进一步由相应的原子态到原子态的跃迁概率 $p$ 给出,其关系为

$$P(C \rightarrow C') = \frac{\sum_{m,n} (2J_m + 1)(2J'_n + 1)p(m \rightarrow n)}{\sum_{m,n} (2J_m + 1)(2J'_n + 1)}, \quad (5)$$

式中, $J_m$ 为组态 $C$ 的一个原子态 $m$ 的总角动量量子数, $J'_n$ 为组态 $C'$ 的一个原子态 $n$ 的总角动量量子数.

对于从 $m$ 态到 $n$ 态的单俄歇跃迁概率可用下列公式计算<sup>[25]</sup>:

$$p^{SA}(m \rightarrow n) = \frac{2\pi}{\hbar} |n|V|m|^2, \quad (6)$$

式中 $V$ 是电子-电子库仑作用算符.

对于从 $m$ 态到 $k$ 态的辐射跃迁,在电偶极近似下,其跃迁概率可用如下公式计算<sup>[25]</sup>:

$$p^R(m \rightarrow k) = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \sum |k|T^{(1)}|m|^2, \quad (7)$$

式中 $T^{(1)}$ 是以 $-ea_0$ 为单位的原子经典电偶极矩.

对于双俄歇跃迁,根据“俄歇+俄歇”理论,即双俄歇过程中两个同时散射出去电子被看成是由两个相关的单俄歇跃迁产生,由初态 $m$ 到末态 $n$ 的双俄歇跃迁概率可用下式计算<sup>[19,23]</sup>:

$$p^{DA}(m \rightarrow n) = \sum_r p^{SA}(m \rightarrow r) \frac{p^{SA}(r \rightarrow n)}{\Gamma(r)}, \quad (8)$$

式中,等号左端为初原子态 $m$ 到末原子态 $n$ 双俄歇跃迁概率;等号右端的求和表示将各种可能的“中间态”都考虑进去,第一个因子是初态 $m$ 到“中间原子态” $r$ 的单俄歇跃迁概率;第二个因子的分子是“中间原子态” $r$ 到末原子态 $n$ 的单俄歇跃迁概率;分母 $\Gamma(r)$ 是“中间原子态” $r$ 的态宽度,

$$\Gamma(r) = \sum P^{SA}(r \rightarrow u) + \sum P^{DA}(r \rightarrow u) + \sum P^R(r \rightarrow u). \quad (9)$$

(9)式等号右端三项分别是“中间态” $r$ 一步退激发单俄歇跃迁概率之和、双俄歇跃迁概率之和及辐射跃迁概率之和.可以看出,欲计算态 $r$ 的宽度,先将态 $r$ 到其第一步退激发的分支跃迁概率算出,其中

的双俄歇跃迁概率  $\sum P^{DA}(r \rightarrow u)$  可用同样的方法计算. 如果态  $r$  到态  $u$  的双俄歇跃迁的“中间原子态”一步退激发中还有双俄歇跃迁, 则还是用同样方法计算. 这样, 依次下去, 直到“中间原子态”的洞处于浅壳层, 以至退激发没有双俄歇分支.

## 4. 结果及讨论

这里, 我们以  $Ar^+(1s^{-1})$  和  $Ar^+(2s^{-1})$  的退激发为例, 详细研究双俄歇跃迁在退激发过程中的贡献, 讨论这两个初激发洞态退激发后的末电离态离子的分布情况.

### 4.1. $Ar^+(1s^{-1})$ 的退激发

在  $Ar^+(1s^{-1})$  的第一步退激发过程中, 有 16 个一级分支. 它们的分支比在表 1 中列出. 从表 1 可以看出,  $Ar^+(1s^{-1})$  通过辐射跃迁退激发到稳定的第 16 一级分支组态, 从而产生 1 价稳定的氙离子. 尽管通过其他退激发通道也能产生 1 价稳定的氙离子, 但与其相比可以忽略, 因此 1 价稳定的氙离子的相对丰度为 0.006294.

$Ar^+(1s^{-1})$  通过单俄歇跃迁退激发到稳定的第 8 一级分支组态和稳定的第 10 一级分支组态而产生 2 价稳定的氙离子的分支比分别为 0.000479 和 0.001984. 另外,  $Ar^+(1s^{-1})$  通过辐射跃迁退激发到第 15 一级分支组态, 由表 1 可知其分支比为 0.078672, 而第 15 一级分支组态还可以通过四个二级分支退激发, 其中有两个二级分支能够成为 2 价稳定的氙离子, 它们的分支比之和为 0.792600. 由此可以得到通过第 15 一级分支退激发产生的 2 价稳定的氙离子的相对丰度为  $0.078672 \times 0.792600 = 0.062355$ . 当然, 通过其他通道也可以产生 2 价稳定的氙离子, 但与这三者相比可以忽略. 于是 2 价稳定的氙离子的相对丰度为  $0.000479 + 0.001984 + 0.062355 = 0.064814$ .

$Ar^+(1s^{-1})$  通过单俄歇跃迁退激发到激发的第 6、第 7 和第 9 一级分支组态, 它们分别通过单俄歇跃迁退激发到稳定的 3 价氙离子, 尽管通过其他退激发通道也能产生 3 价稳定的氙离子, 但与之相比可忽略, 则 3 价稳定的氙离子的相对丰度为 0.063370.

产生 4 价、5 价、6 价稳定的氙离子的退激发通道非常多, 不再一一详述. 计算得出的这三个价态

的离子的相对丰度分别为 0.393557, 0.317985 和 0.116672.

7 价和 8 价稳定的氙离子只有通过第一分支组态的多步退激发产生, 其通道数目较多, 不便于详述. 计算得到这两种电离度的氙离子的相对丰度分别为 0.013662 和 0.003218.

表 1  $Ar^+(1s^{-1})$  第一步退激发各一级分支的分支比

组态分支	分支序号	退激发机制	分支比
$1s^2 2s^0 2p^6 3s^2 3p^6$	1	SA	0.047272
$1s^2 2s^1 2p^5 3s^2 3p^6$	2	SA	0.137506
$1s^2 2s^1 2p^6 3s^1 3p^6$	3	SA	0.009167
$1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p^5$	4	SA	0.011425
$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^6$	5	SA	0.329740
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^1 3p^6$	6	SA	0.011972
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^5$	7	SA	0.049187
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^0 3p^6$	8	SA	0.000479
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^5$	9	SA	0.001026
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	10	SA	0.001984
$1s^2 2s^1 2p^6 3s^1 3p^5$	11	DA	0.008608
$1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p^4$	12	DA	0.023633
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^1 3p^5$	13	DA	0.056324
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^4$	14	DA	0.226713
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^6$	15	R	0.078672
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	16	R	0.006294

注 SA, DA 和 R 分别代表单俄歇、双俄歇和辐射跃迁.

为了描述双俄歇跃迁对退激发的贡献, 我们引入了“双俄歇比”的概念, 即某一洞态在一步退激发过程中的双俄歇跃迁概率之和占所有俄歇(单俄歇和双俄歇)跃迁概率之和的比例.

在  $Ar^+(1s^{-1})$  退激发过程中出现的分支的双俄歇比在表 2 中列出. 从表 2 可以看出: K 壳层洞态的双俄歇比相当大, 约为 33.15%; L 壳层洞态退激发的双俄歇比在 20.45%—40.96% 范围之内. 由此可见, 退激发过程中双俄歇跃迁的贡献是非常大的, 这就解释了在末电离态中高价离子态的相对丰度大而低价离子态的相对丰度小的实验结果.

表 2  $Ar^+(1s^{-1})$  退激发过程中出现的分支的双俄歇比

组态	双俄歇比/%	组态	双俄歇比/%
$1s^1 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	33.15	$1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p^4$	30.35
$1s^2 2s^0 2p^6 3s^2 3p^6$	25.62	$1s^2 2s^1 2p^5 3s^2 3p^6$	23.08
$1s^2 2s^1 2p^5 3s^1 3p^6$	33.04	$1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p^3$	33.48
$1s^2 2s^1 2p^5 3s^2 3p^5$	22.35	$1s^2 2s^1 2p^6 3s^1 3p^6$	40.96
$1s^2 2s^1 2p^5 3s^2 3p^4$	30.84	$1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p^5$	30.98
$1s^2 2s^1 2p^6 3s^1 3p^5$	20.45	$1s^2 2s^1 2p^6 3s^1 3p^4$	39.69

图 1 给出了  $\text{Ar}^+(1s^{-1})$  的末电离态离子的分布, 作为比较, 我们也给出了已有理论和实验结果. 最大布居出现在 4 价末电离态离子, 且我们的结果与实验结果符合很好, 特别是与文献 [6] 的实验结果一致性极强, 而 1 价、2 价和 3 价稳定的末电离态离子的相对丰度比文献 [5] 的实验结果略低, 5 价和 6 价的末电离态离子的相对丰度略高于实验结果; 由于在计算过程中忽略了产生的末电离态离子的相对丰度小于 0.0001 的退激发通道对退激发过程的贡献, 因此 7 价和 8 价的末电离态离子的相对丰度略低于实验结果.

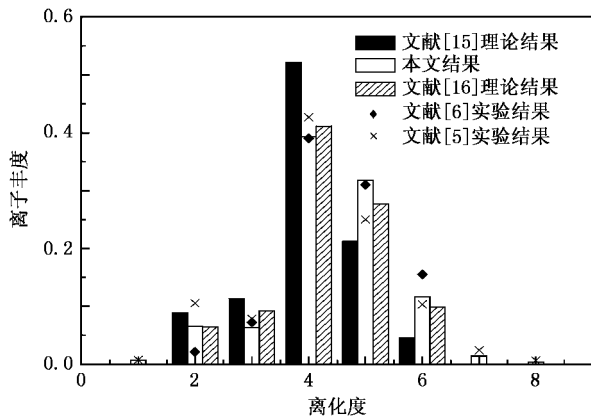


图 1  $\text{Ar}^+(1s^{-1})$  退激发后末电离态离子布居及其与实验和其他理论结果的比较

#### 4.2. $\text{Ar}^+(2s^{-1})$ 的退激发

$\text{Ar}^+(2s^{-1})$  第一步退激发有 8 个一级分支, 各分支的分支比在表 3 中给出. 从表 3 可以看出, 由初态经辐射跃迁产生的第 8 一级分支组态已经稳定, 由这一通道产生的 1 价稳定离子的相对丰度为 0.000298. 其他通道产生的 1 价稳定离子与之相比可以忽略, 于是  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  退激发后产生的 1 价稳定离子的相对丰度为 0.000298.

表 3  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  第一步退激发的各一级分支组态及其分支比

退激发分支组态	分支序号	退激发机制	分支比
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^1 3p^6$	1	SA	0.255731
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^4$	2	DA	0.255731
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^5$	3	SA	0.416046
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^0 3p^6$	4	SA	0.018532
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^5$	5	SA	0.051429
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	6	SA	0.002307
$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^6$	7	R	0.000074
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	8	R	0.000298

注: SA, DA 和 R 分别代表单俄歇、双俄歇和辐射跃迁.

由初态经双俄歇跃迁产生的第 4 和第 6 一级分支组态已经稳定, 因此 2 价稳定离子的相对丰度为 0.020839.

由初态经辐射跃迁而至的第 7 一级分支组态的分支比特别小, 由它进一步退激发产生的稳定离子的相对丰度可以不予考虑; 由初态经单俄歇跃迁产生的第 1、第 3 和第 5 一级分支组态还是激发的, 它们经单俄歇跃迁可以产生 3 价稳定离子, 于是 3 价稳定离子的相对丰度为 0.723206.

由初态经双俄歇跃迁产生的第 2 一级分支组态是激发的, 它经两条不同的通道退激发可以产生 4 价和 5 价稳定离子. 其中 4 价稳定离子的相对丰度为 0.179311, 5 价稳定离子的相对丰度为 0.076420.

用表 3 的数据可以算出  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  第一步退激发的双俄歇比约为 25.58%. 由此可知双俄歇跃迁对  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  洞态整个退激发过程的贡献是很大的, 如果忽略双俄歇跃迁的贡献, 理论计算中将不会有 5 价稳定的离子产生.

图 2 给出了  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  的末电离态离子的分布, 作为比较, 我们也给出了已有理论和实验结果. 最大布居出现在 3 价末电离态离子, 4 价末电离态离子的相对丰度低于实验结果, 而 5 价的末电离态离子的相对丰度高于实验结果. 在处理 L 壳层洞态退激发问题时, 我们的理论尽管不如 RACS 理论与实验符合得好, 还是优于 RAC 理论的计算结果.

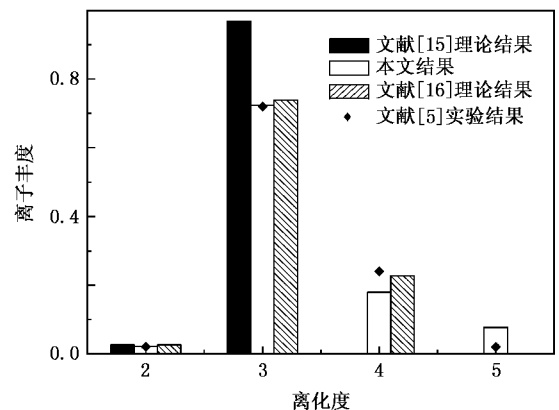


图 2  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  退激发后末电离态离子布居及其与实验和其他理论的比较

## 5. 结 论

在 RAC 模型的基础上, 通过考虑双俄歇跃迁对洞原子(或离子)的退激发过程的贡献, 我们建

立了 RACDA 模型, 并用此模型研究了  $\text{Ar}^+(1s^{-1})$  和  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  的退激发过程及末电离态离子的分布, 得到了与实验符合得很好的结果. 从本文计算得到的  $K$  壳层和  $L$  壳层洞态的双俄歇比可以看出, 双俄歇

跃迁是一种非常重要的退激发过程, 在原子(或离子)的内壳层洞态的退激发过程的研究中必须予以细致地考虑.

- 
- [ 1 ] Winter H , Aumayr F 1999 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** R39
- [ 2 ] Viehhaus J , Cvejanovic S , Langer B *et al* 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 083001
- [ 3 ] Tawara H , Hayaishi T 1992 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1476
- [ 4 ] Carlson T A , Krause M O 1965 *Phys. Rev. Lett.* **14** 390
- [ 5 ] Carlson T A , Hunt W E , Krause M O 1966 *Phys. Rev.* **151** 41
- [ 6 ] Church D A , Kravis S D , Sellin I A *et al* 1987 *Phys. Rev. A* **36** 2487
- [ 7 ] Tanis J A , Chesnel J Y , Fremont D *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1131
- [ 8 ] Ueda K M , Kitajima M , Fanis A D *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 153005
- [ 9 ] Oura M , Mukoyama T , Taguchi M *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 173002
- [ 10 ] Drescher M , Hentschel M , Klenberger R *et al* 2002 *Nature* **419** 803
- [ 11 ] Fritzsche S , Fischer C F 2000 *Comp. Phys. Commun.* **124** 340
- [ 12 ] Fritzsche S , Aksela H , Dong C Z *et al* 2003 *Nucl. Instrum Methods Res. B* **205** 93
- [ 13 ] Kamngieber B , Jain M , Demekhin V F *et al* 2000 *Phys. Rev.* **62** 014702
- [ 14 ] Ding X B , Dong C Z , Fritzsche S 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 85 ( in Chinese ) 丁晓彬、董晨钟、Fritzsche S 2004 物理学报 **53** 85 ]
- [ 15 ] Omar G , Hahn Y 1991 *Phys. Rev. A* **44** 483
- [ 16 ] Omar G , Hahn Y 1991 *Z. Phys.* **D 25** 41
- [ 17 ] Kochur A G , Dudenko A I , Sukhorukov V L *et al* 1994 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **27** 1709
- [ 18 ] Simons R L , Kelly H P 1980 *Phys. Rev. A* **22** 625
- [ 19 ] LaGattuta K J , Hahn Y 1981 *Phys. Rev. A* **24** 2273
- [ 20 ] Pindzola M S , Griffin D C 1987 *Phys. Rev. A* **36** 2628
- [ 21 ] Saito N , Suzuki I H 1992 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1785
- [ 22 ] Hindi M M , Zhu L , Avci R *et al* 1996 *Phys. Rev. A* **53** 3716
- [ 23 ] Amusia M Y , Lee I S , Kilin V A 1992 *Phys. Rev. A* **45** 4575
- [ 24 ] Marques J P , Parente F , Indelicato P *et al* 1998 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** 2897
- [ 25 ] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* ( London :University of California Press )p401 ,526

# Cascade decays and final charge-state distribution of hollow argon ions<sup>\*</sup>

Hu Hong-Wei Dong Chen-Zhong<sup>†</sup>

( College of Physics and Electronic Engineering , Northwest Normal University , Lanzhou 730070 , China )

( Received 3 April 2006 ; revised manuscript received 26 June 2006 )

## Abstract

On the basis of a previous model of radiative-Auger-cascade for calculation of final-charge-state distributions of hollow ions , a new model of radiative-Auger-double Auger-cascade has been constructed by including double Auger process , and was applied to study the final-charge-state distribution in the production of  $\text{Ar}^+(1s^{-1})$  (argon ion with an initial 1s hole) and  $\text{Ar}^+(2s^{-1})$  (argon ion with an initial 2s hole). Comparing with the previous calculations and experiments , the present results show excellent agreement .

**Keywords :** radiative-Auger-cascade model , double Auger transition , radiative-Auger-double Auger-cascade model , decay of hollow ions

**PACC :** 3280H , 3280D , 3270F

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10376026 , 10434100 ) , the Foundation of Center of Theoretical Nuclear of Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou and the International Cooperation Program of Ministry of Science and Technology of China ( Grant No. CI-2004-07 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : dongcz@nwnu.edu.cn